



First-Principle Studies on the Origin of Amino Acid Chirality in Interstellar Space

著者	SATO Akimasa
発行年	2017
その他のタイトル	第一原理計算に基づく星間空間におけるアミノ酸キラリティの起源に関する研究
学位授与大学	筑波大学 (University of Tsukuba)
学位授与年度	2017
報告番号	12102甲第8328号
URL	http://hdl.handle.net/2241/00149941

氏 名	佐藤 皓允
学 位 の 種 類	博 士 (理 学)
学 位 記 番 号	博 甲 第 8328 号
学位授与年月日	平成 29 年 7 月 25 日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
審 査 研 究 科	数理解物質科学研究科
学 位 論 文 題 目	

First-Principle Studies on the Origin of Amino Acid Chirality in Interstellar Space.
(第一原理計算に基づく星間空間におけるアミノ酸キラリティの起源に関する研究)

主 査	筑波大学教授	博士(理学) 重田 育照
副 査	筑波大学教授	理学博士 梅村 雅之
副 査	筑波大学教授	博士(理学) 岡田 晋
副 査	東京大学教授	博士(理学) 相川 祐理

論 文 の 要 旨

地球上の生命は生体分子であるアミノ酸により構成されている。アミノ酸は鏡像異性体であり、L 型と D 型を持つ。一方で地球上の生命はこのうち L 型のみを用いており、この原因は未だ謎である。この異性体過剰の起源は、その特性である光吸収活性の差に由来すると考えられ、この性質が有効的に効く宇宙空間が異性体過剰の起源である可能性が高いことが近年示唆されている。これまで地球外におけるアミノ酸探索として、炭素質隕石中における様々な種のアミノ酸が測定されており、これらは地球上同様 L 型異性体過剰を起こしていることがわかっている。また近年、星間空間におけるアミノ酸前駆体が観測され、さらには彗星ダスト中でグリシンの存在も報告された。これらの事実から地球外における有機分子の存在やその生成機構が多く明らかになり、地球外におけるアミノ酸の存在は揺るぎない。

本研究では、(1) これまでに見つかった星間分子に基づくラジカルカップリング反応を用いたアミノ酸生成機構の解明、(2) 星間空間におけるアミノ酸の光吸収活性の検証およびアミノ酸異性体過剰の起源となり得る光不斉反応を引き起こす星間輻射の提案、を行った。具体的には、現在提案されているラジカル反応を用いた温度別グリシン生成機構に基づき、既に観測されている星間分子からグリシン生成に至るまでの包括的な生成経路の提案と経路における各反応のエネルギープロファイルについての計算科学的検証を行った。密度汎関数法による量子化学計算を用い、各反応における生成熱と反応エネルギー障壁を評価することでその経路の妥当性について議論した。さらにアミノ酸主鎖を構成する炭素および窒素の起源となる分子の提案とそれらの組み合わせについて検証した。次に、L 型アミノ酸異性体過剰の起源解明に向け、その引き金となる光不斉反応についてアミノ酸の光吸収活性の側面からアプローチを行った。時間依存密度汎関数法および Symmetry Adapted Cluster/Configuration Interaction (SAC-CI) 法を用い、アミノ酸の電子励起状態

解析を行い、真空紫外線領域における吸収強度の評価を行った。さらにそれらアミノ酸に対し、有意な光不斉反応を引き起こすと考えられる実際の星間輻射を推定し、同輻射場において期待される異性体過剰値を見積もった。

これらの結果として、まず星間空間におけるラジカル分子を用いたグリシン生成は、大きく二つの経路に集約されることがわかった。加えてこれらの経路における反応のほとんどにおいて反応障壁がないことがわかった。これは星間空間のように極低温下でかつ外部エネルギー供給の少ない環境下においても反応が進むことを示唆する。さらにグリシン生成に必要な星間分子には、メタノール、シアン化水素、およびアンモニアが重要であると考えられ、ラジカル生成機構によってどの位置の重原子がどの分子由来かを解明した。また、分子の光吸収スペクトルと銀河形成の初期段階であるとされるライマン α 輝線天体の観測スペクトルとを重ね合わせることで光不斉反応に重要な波長・励起エネルギーの特定を行ない、アミノ酸は121.56 nm近傍で種類によらず共通に強い光不斉吸収活性を示すことがわかった。さらにこれらの結果から期待される異性体過剰値をアラニンに対して見積もることで、対応する実験と定性的に良い一致を得ることができた。これは星間空間における特定の輻射場下で、アミノ酸が有意な異性体過剰を引き起こすことを理論的に実証するものである。よって本論文は、星間空間におけるラジカルを介したアミノ酸生成機構と、アミノ酸異性体過剰の引き金となる光不斉吸収機構についての知見を深めたといえる。

審 査 の 要 旨

〔批評〕

本学位論文では、非常に低温・低圧環境である宇宙空間では、中性分子の化学反応よりもむしろラジカルを起源とする反応が進行しやすいことを考慮し、温度別グリシン生成機構、および、その原子の起源を第一原理計算より明らかにしている。また、アミノ酸の光吸収特性と実験で観測されるライマンアルファ輝線天体の特徴的発光ピークの類似性に着目し、第一原理計算に基づく円偏光二色性スペクトルの解析、および、ライマンアルファ輝線天体の輻射を考慮した分解効率の算出から、宇宙由来のアミノ酸のL型過剰の一因を明らかにした画期的な研究である。本博士論文では、物理学的理論に基づき、物質・生命科学と宇宙科学を横断した学際融合領域の研究を開拓するなど、その学術的価値は極めて高い。特に宇宙生命物理学分野は現在急速に発展しており、本学位論文の成果はそのパイオニアとなりうる結果が含まれていることから、今後ますます重要になるものと期待できる。

〔最終試験結果〕

平成29年6月19日、数理物質科学研究科学学位論文審査委員会において審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、審査委員全員によって、合格と判定された。

〔結論〕

上記の論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士(理学)の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。